

# Лекция 1

## Введение. Квантово-механическая модель строения атома

### План лекции

1. Введение. Предмет изучения химии.
2. Основные теории строения атома.
3. Квантово-механическая модель атома. Основные положения квантовой механики.
4. Квантовые числа. Атомные орбитали.
5. Выводы.

### Введение

**Химия** – естественная наука, изучающая состав, строение, свойства и превращения веществ, а также явления, сопровождающие эти превращения.

**Изучение химии** в техническом вузе имеет два аспекта:

- 1) **общеобразовательный** – для создания целостного естественно-научного мировоззрения;
- 2) **прикладной** – для решения химических вопросов специальности.

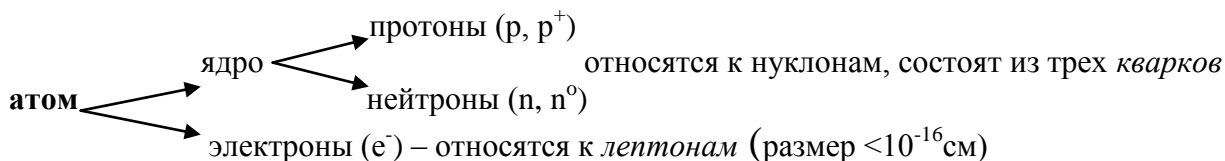
**Химия в энергетике** – это реакции горения, это химия воды и топлива, решение проблем новых источников энергии, новых материалов, технологий и процессов, решение экологических проблем.

**М.В.Ломоносов** (1741 г.) – “Химическая наука рассматривает свойства и изменения тел..., состав тел..., объясняет причину того, что с телами при химических превращениях происходит”.

**Д.И.Менделеев** (в “Основах химии” 1871 г.) – “Химия – это учение об элементах и их соединениях”.

### Электронное строение атома

**Атом** - сложная электромагнитная микросистема, являющаяся носителем свойств химического элемента.



Число протонов в ядре равно числу электронов в электронной оболочке атома.

→ **Атом в целом нейтрален, не имеет заряда.**

**Изотопы** – разновидности атомов одного химического элемента, имеющие одинаковый порядковый номер, но разные массовые числа

массовое число →  $^{35}\text{Cl} (17\text{p}^+, 18\text{n}, 17\text{e}^-)$   
 заряд ядра → 17

$$M_r(\text{Cl}) = 35 \cdot 0,7543 + 37 \cdot 0,2457 = 35,491 \text{ атом.ед.массы}$$

Частица	Кто и когда открыл	Система СИ Заряд, Кл	Атомные ед.заряда	Система СИ масса, кг	Атомные ед. массы
$e^-$	Дж.Томсон, 1897	$1,6 \cdot 10^{-19}$	- 1	$9,11 \cdot 10^{-31}$	0,000548
$p^+$	Э.Резерфорд 1911-1919	$1,6 \cdot 10^{-19}$	+ 1	$1,6 \cdot 10^{-27}$	1,007
$n^0$	Дж.Чедвик, 1932	0	0	$1,6 \cdot 10^{-27}$	1,008

## Основные теории строения атома

Почему атом – устойчивая, стабильная система?

Почему электрон не излучает энергии при движении?

Ответ дает квантовая механика:

**поведение движущихся микрообъектов** (элементарных частиц, в том числе и электронов) не подчиняется законам классической механики, а подчиняется **законам квантовой механики**.

**Планетарная модель Резерфорда (1911):**

атом состоит из **положительного ядра**, малого по объему ( $10^{-14}\text{м}$ ), но в котором сосредоточена почти **вся масса**, и **отрицательных электронов**, вращающихся вокруг ядра по **круговым орбитам**.

**Квантовая модель Бора (1913):**

**Энергия и импульс** электрона **квантованы**;

Электрон движется только по **разрешенным орбитам**, которым отвечает определенная энергия;

Электрон поглощает или испускает энергию только при **переходе** с одной разрешенной орбиты на другую.

**Квантово-механическая модель (середина 20-х годов).**

## Основные положения квантовой механики

**Квантование энергии:**

*Макс Планк (1900 г., Германия)* – вещества испускают и поглощают энергию дискретными порциями (квантами). Энергия кванта пропорциональна частоте излучения (колебания)  $\nu$ :

$$E = h\nu$$

$h$  – постоянная Планка ( $6,626 \cdot 10^{-34}$  Дж·с);  $\nu = c/\lambda$ ,  $c$  – скорость света,  $\lambda$  – длина волны.

**Дуализм электромагнитных волн:**

*Альберт Эйнштейн (1905 г.)* - любое излучение - это поток квантов энергии (фотонов).

$$E = mc^2$$

$m$  – масса фотона,  $c$  – скорость света,  $3 \cdot 10^8$  м/с

### Дуализм электрона:

*Луи де Бройль (1924 г., Франция):* электрон также характеризуется корпускулярно-волновой двойственностью.

С одной стороны, электрон - **частица** с энергией  $E_e = m_e v^2$ , с другой, **волна**  $E_e = h\nu = hc/\lambda$ . Приравнявая оба уравнения, получаем уравнение де Бройля:

$$\lambda = h / m_e v$$

$m_e$  – масса электрона ( $9,1 \cdot 10^{-31}$  кг);  $v$  – скорость движения электрона.

Электрон в атоме – **стоячая волна**, которая должна укладываться на круговой орбите **целое число раз**.

### !Уравнение Шредингера:

*(Шредингер 1926 г., Германия)- математическое* описание состояния электрона в атоме, основное уравнение квантовой механики. *Шредингер* распространил волновое уравнение для стоячей волны на «волны материи», ввел знаменитую  $\psi$ -функцию:

$$\psi E = \psi U + \psi H$$

$\psi$  – амплитуда колебания этой волны, когда микрочастица движется во внешнем поле, например, ядра атома. Форма колебаний зависит от квантовых чисел ( $n, l, m_l$ ), которые получаются как численные решения уравнения Шредингера.

1933 год – Нобелевская премия за создание волновой механики.

Таким образом,  **$\psi$ -функция описывает некий волновой процесс, но не имеет определенного физического смысла, так как этот процесс не является каким-то реальным физическим полем.**

Истинный смысл волновой функции можно понять на основе **принципа неопределенности**.

### Принцип неопределенности:

*Вернер Гейзенберг (1927г., Германия)* – произведение неопределенности положения (координаты) частицы  $\Delta x$  и импульса  $\Delta(mv)$  не может быть меньше  $h/2\pi$ .

$$\Delta x \cdot \Delta(mv) \geq h/2\pi$$

( $\Delta$  - погрешность, неопределенность в измерении).

**Смысл: принципиально невозможно определить одновременно положение и импульс движения микрочастицы с абсолютной точностью.**

### Макс Борн:

*вероятность найти электрон в той или иной точке пространства в данный момент времени равна  $|\psi|^2$ .*

$|\psi|^2$  – **плотность вероятности**.

Решить уравнение Шредингера - значит найти в явном виде  $\psi$ -функцию и полную энергию  $E$  частицы.

В простейшем случае  $\psi = \psi(x, y, z)$ . (Точное решение - только для простейших систем, например, для атома водорода).

**Решение уравнения:  $\psi = \psi(x, y, z)$  – орбиталь.**

**Орбиталь** – ограничивает область пространства, в котором наиболее высока вероятность (не менее 95%) обнаружить электрон.

Энергия и форма орбитали зависят от квантовых чисел, которые непосредственно входят в решение уравнения Шредингера. Три квантовых числа  $n, l, m_l$  полностью определяют орбиталь.

$$\psi = \psi(x, y, z) = \psi(n, l, m_l).$$

Графически АО изображается



Так как электрон несет отрицательный заряд, то его орбиталь представляет собой определенное распределение заряда, которое получило название *электронного облака*.

## Квантовые числа

### 1. Главное квантовое число ( $n$ ):

- определяет энергетический уровень (оболочку) атома
- определяет размер орбитали (электронного облака)
- принимает целые положительные значения от 1 до  $\infty$

$n$  (номер энергетического уровня): **1 2 3 4** и т.д.

название оболочки

**K L M N**

—————→ Е увеличивается

Чем **дальше** от ядра энергетический уровень, тем **больше** его **энергия** и больше **размер** атомной **орбитали**)

### 2. Орбитальное квантовое число ( $l$ ):

- **определяет** – орбитальный момент количества движения электрона
- **показывает** – форму орбитали
- **принимает значения** – от 0 до  $(n-1)$

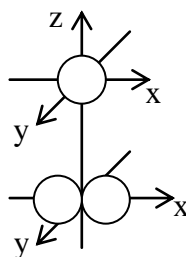
Графически любая АО -



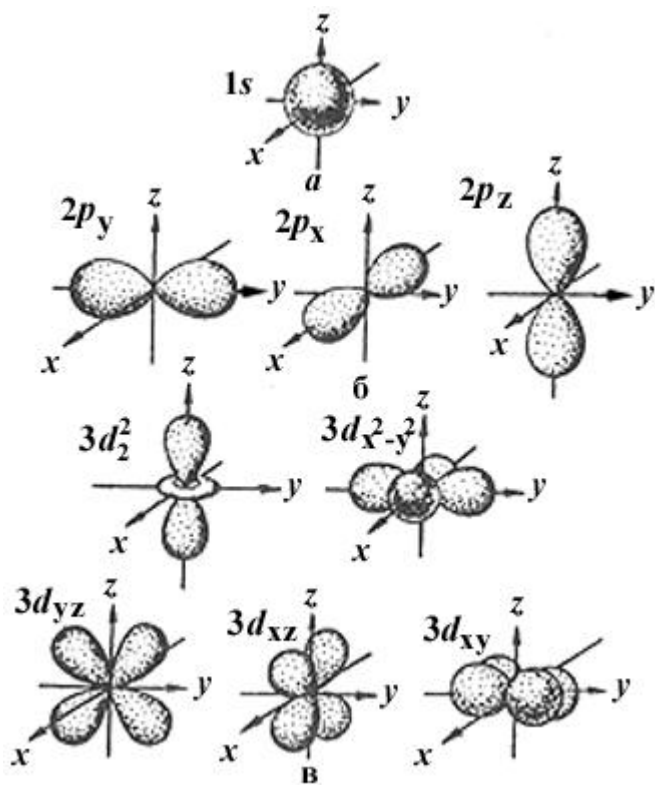
Орбитальное кв. число ( $l$ )	0	1	2	3	4
Энергетический подуровень	<i>s</i>	<i>p</i>	<i>d</i>	<i>f</i>	<i>g</i>

$l = 0 \rightarrow s$  – подуровень  $\rightarrow s$  – АО  $\rightarrow$   
сферическая

$l = 1 \rightarrow p$  – подуровень  $\rightarrow p$  – АО  $\rightarrow$   
форма объемной восьмерки



Орбитали с орбитальным квантовым числом **2** называются ***d*-орбиталями** и имеют более **сложную форму** (см. рисунок), чем *p*-орбитали. Электроны с  $l = 2$  называются ***d*-электронами**.



**Формы электронных облаков различных атомных орбиталей и их ориентация в пространстве**

Наконец, орбитали с орбитальным квантовым числом 3 получили название *f-орбиталей*. Их форма еще сложнее, чем форма *d-орбиталей*. (см.Интернет). Электроны с  $l = 3$  получили название *f-электронов*.

Каждому  $n$  соответствует определенное число значений  $l$ , т.е. каждый энергетический уровень расщепляется на подуровни.

**Число подуровней равно номеру уровня.**

- 1-ый энерг.уровень → 1 подуровень → 1s
- 2-ой энерг.уровень → 2 подуровня → 2s2p
- 3-ий энерг.уровень → 3 подуровня → 3s3p3d
- 4-ый энерг.уровень → 4 подуровня → 4s4p4d4f и т.д.

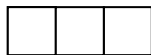
### 3. Магнитное квантовое число ( $m_l$ )

- **определяет** – значение проекции орбитального момента количества движения электрона на произвольно выделенную ось
- **показывает** – пространственную ориентацию АО
- **принимает значения** – от  $-l$  до  $+l$

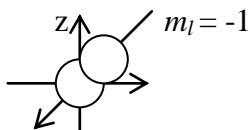
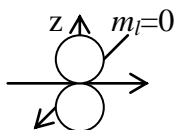
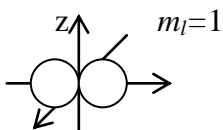
Любому значению  $l$  соответствует  $(2l+1)$  значений магнитного квантового числа, т.е.  $(2l+1)$  возможных расположений электронного облака данного типа в пространстве.

s-состояние – одна орбиталь ( $2 \cdot 0 + 1 = 1$ ) -  $m_l = 0$ , т.к.  $l = 0$

p-состояние – три орбитали ( $2 \cdot 1 + 1 = 3$ )



$m_l: +1 \quad 0 \quad -1$ , т.к.  $l = 1$



**Вывод** – АО характеризуется определенным набором  $n, l, m_l$ , т.е. определенными размерами, формой и ориентацией в пространстве.

Оболочка Энерг.уровень	Гл кв. ч.п	Подуровни		Значения $m_l$	Число АО: $N=n^2$
		Буквеное обозначение	Значение $l$		
<b>K</b>	<b>1</b>	<i>s</i>	<b>0</b>	<b>0</b>	<b>1</b>
<b>L</b>	<b>2</b>	<i>s</i>	<b>0</b>	<b>0</b>	<b>1</b>
		<i>p</i>	<b>1</b>	<b>-1, 0, +1</b>	<b>3</b>
					<b><math>\Sigma 4</math></b>
<b>M</b>	<b>3</b>	<i>s</i>	<b>0</b>	<b>0</b>	<b>1</b>
		<i>p</i>	<b>1</b>	<b>-1, 0, +1</b>	<b>3</b>
		<i>d</i>	<b>2</b>	<b>-2, -1, 0, +1, +2</b>	<b>5</b>
					<b><math>\Sigma 9</math></b>
<b>N</b>	<b>4</b>	<i>s</i>	<b>0</b>	<b>0</b>	<b>1</b>
		<i>p</i>	<b>1</b>	<b>-1, 0, +1</b>	<b>3</b>
		<i>d</i>	<b>2</b>	<b>-2, -1, 0, +1, +2</b>	<b>5</b>
		<i>f</i>	<b>3</b>	<b>-3, -2, -1, 0, +1, +2, +3</b>	<b>7</b>
					<b><math>\Sigma 16</math></b>

#### 4. Спиновое квантовое число ( $m_s$ )

- **определяет** - собственный механический момент электрона, связанный с движением его вокруг своей оси
- принимает значения  $+1/2 \downarrow$  или  $-1/2 \uparrow$  обозначается графически стрелками  $\uparrow$  или  $\downarrow$  в орбитали
- спин электрона  $s = 1/2 \cdot h/2\pi$

#### **Вывод:**

**Состояние любого электрона в атоме может быть полностью охарактеризовано определенным набором из четырех рассмотренных квантовых чисел. При этом в атоме не может быть двух электронов с одинаковым набором всех четырех квантовых чисел.**